

Département de Physique

Département de Physique



Université Ibn Tofail Faculté des Sciences Kenitra
جامعة ابن طفيل كلية العلوم القنيطرة

UNIVERSITÉ IBN TOFAIL
FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

MÉMOIRE DE PROJET DE FIN D'ETUDES
FILIÈRE : SMP

La diffraction des rayons X

Elaboré par:

Saida ZBOURED
Zakia RAJEDAUI

Encadré par:

Fahoume MOUNIR

Soutenu le 23 Juin devant le Jury :

Faïçal Bennani	<i>Président</i>
Mounir Fahoume	<i>Encadrant</i>

Année Universitaire : 2014 – 2015

P
F
E

DEDICACE:

*À la Vie, long chemin à tracer,
à nos père,
à nos mère,
à nos frères, _ et à nos sœurs.....*

Remerciements

Nous tenons à remercier Mr. El mehdi Al IBRAHMI, pour avoir dirigé et guidé notre PFE et pour nous avoir proposé ce sujet de recherche...

Nous remercions tout d'abord Mme. Hanan EL FAYLALI et Mr. EL MERABET Youssef, Professeurs à la Faculté des Sciences de Kenitra pour avoir gentiment accepté de juger ce travail et participé à notre jury.

La diffraction des rayons X

Résumé :

Ce travail a donc permis de rappeler historique de programmation, le principe de leur fonctionnement, leurs différents types, leurs applications en instrument d'optique. La programmation est une notation conventionnelle destinée 'a traduire dans sa globalité nos pensees en instruments au sein de système informatique d'une manière fiable et intuitive. Le langage C, un des premiers langages de programmation, crée et développe entre 1969 et 1973.

On a propose dans ce projet les trois chapitre suivants: Le premier chapitre a traite des systèmes d'équations et leurs résolutions en analyse numérique.

Le deuxièmes chapitre englobe les annonces de programmation:

- Programme.
- Algorithme.
- Instrument. . .

Enfin on a fait un petit programme qui etudie la distance de l'oeil pour un system optique est quelques rappel sur l'instrument optique qui s'intéresse a la correction les défauts d'oeil.

Mots-clés : programmation,algorithme ,methode numerique ,instrument optique...

Abstract :

This work has served to remind programming history, the principle of their operation, their different types, their applications in optical instrument. Programming is a conventional notation for 'was translated in its entirety our thoughts instruments within computer system in a reliable and mannered intuitive. The C language, one of the first programming languages, creates and develops between 1969 and 1973.

We propose in this project the three following chapters: The first chapter deals with equations systems and their resolutions for analysis digital.

The second chapter includes programming announcements:

- Program.
- Algorithm.
- Instrument. . .

Finally we made a small program that'étudie the distance of the eye to a system Optical is some reminder about the optical instrument that is interested in correcting the eye defects.

Keywords : programmation, numerical analysis...



SOMMAIRE

Dedicatory	i
Remerciements	ii
Abstract	iii
Liste des Figures	vii
Liste des Tables	viii
1 Production des rayons x pour la diffraction	2
1.1 Historique des rayons x	2
1.2 Production des rayons x	3
1.3 Tube a rayon x	3
1.4 Interaction des électrons avec la matière	4
1.4.1 Interaction avec le champ électrique péri nucléaire :	5
1.4.2 Interaction avec les électrons :	5
2 Analyse spectrale des rayons x	6
2.1 Spectre d'émission :	6
2.2 Spectre continue	6
2.3 Spectre discret :	7
2.4 Interaction des rayons x avec la matière :	8
2.4.1 Absorption des rayons x :	8
2.5 Réfraction :	9
3 généralité et principe physique du diffraction	10
3.1 Condition de diffraction de Bragg (loi de Bragg) :	11
3.2 Méthodes des poudres	12
3.3 Diffractomètre	12
3.3.0.1 Principe de la méthode	12
3.4 Méthode du cristal tournant	14
3.5 Méthode de Laue	14
3.5.1 Principe de la méthode	14
4 Les applications de la diffraction des rayons x	16

4.1	Le rôle des rayons x	16
4.2	Facteur de structure	16
4.3	Exemple	17
4.4	Résultat	17
4.4.1	Détermination d'une structure cristalline	17

Liste des Figures

1.1	schéma d'un tube a rayon x	4
2.1	Variation du spectre continue en fonction de la tension appliquée	7
2.2	Décomposition des transitions à l'origine du spectre de raies	8
3.1	Principe du diffractomètre de poudre	13
3.2	Les rayons diffractés sont enregistrés sur un film photographique normal au pinceau incident.	15
3.3	Diagramme de Laüe	15

Liste des Tables

Introduction

Les rayons x sont des ondes électromagnétiques due à la combinaison de deux champs perpendiculaires en phase l'un électrique et l'autre magnétique.

Les rayons X sont classés dans l'échelle des longueurs d'onde entre les radiations ultraviolettes et les rayons γ . Ces limites ne sont pas précises et, en fait, c'est plutôt leur mode de production qui définit les rayons X : ils sont émis par le bombardement de la surface d'un solide par des rayons Cathodiques ou faisceaux d'électrons accélérés par des tensions variant entre 10^3 et 10^6 volts.

Longueur d'onde et fréquence des différentes radiations électromagnétiques

Classe de rayonnement	DOMAINE HERTZIEN		INFRAROUGE	LUMIERE VISIBLE (Rouge à violet)	ULTRAVIOLET	RAYONS X	RAYONS γ
	Ondes radio	Micro-ondes					
Longueur d'onde λ (en nm)	$> 10^9$	$10^9 \text{ à } 10^6$	$10^6 \text{ à } 7 \cdot 10^2$	$7 \cdot 10^2 \text{ à } 4 \cdot 10^2$	$4 \cdot 10^2 \text{ à } 10$	$10 \text{ à } 0,03$	$< 0,03$
Fréquences ν (en Hz)	$< 3 \cdot 10^8$	$3 \cdot 10^8 \text{ à } 3 \cdot 10^{11}$	$3 \cdot 10^{11} \text{ à } 4,3 \cdot 10^{14}$	$4,3 \cdot 10^{14} \text{ à } 7,5 \cdot 10^{14}$	$7,5 \cdot 10^{14} \text{ à } 3 \cdot 10^{16}$	$3 \cdot 10^{16} \text{ à } 10^{19}$	$> 10^{19}$
(les valeurs de ce tableau sont arrondies)							

Chapitre 1

Production des rayons x pour la diffraction

1.1 Historique des rayons x

a la fin du sixième siècle, tous les grands physiciens s'intéressent aux propriétés des rayons cathodiques



wilhelm röntgen, un physicien allemand, étudie lui aussi ce phénomène et découvre les rayons x le 28 décembre 1895, *wilhelm* publie sa découverte dans la société physico-chimique de *wurtzbourg*.

C'est cette découverte qui lui vaudra le premier prix nobel de physique en 1901.

Il tire quatre conclusions dans son article :

1. Les rayons x sont absorbés par la matière ; leur absorption est en fonction de la masse atomique des atomes absorbants ;
2. Les rayons x sont diffusés par la matière ;
3. Les rayons x impressionnent la plaque photographique ;
4. Les rayons x déchargent les corps chargés électriquement.

1.2 Production des rayons x



Tube a rayons x

1.3 Tube a rayon x

Les rayons x sont produit dans des tubes à rayons x dont le schéma est la suivante :

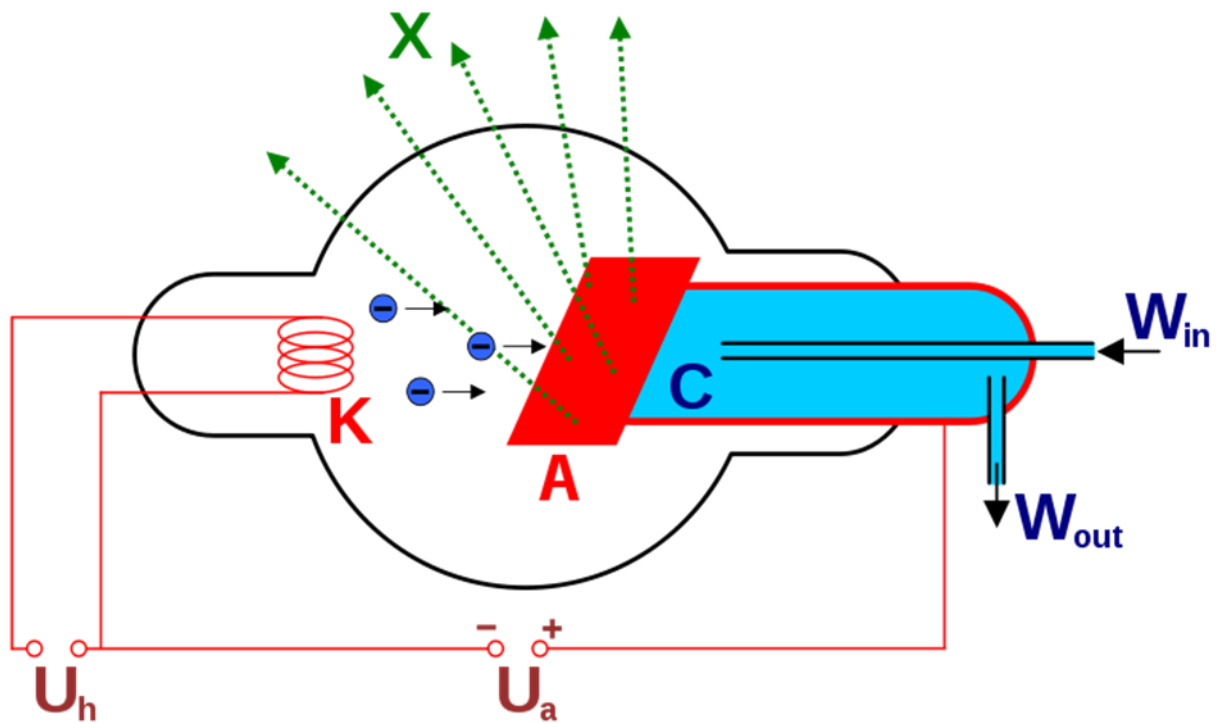


FIGURE 1.1: schéma d'un tube a rayon x

Quel que soit le type de tube, la génération des rayons X se fait selon le même principe. Une haute tension électrique (de l'ordre de 20 à 400 kV) est établie entre deux électrodes. Il se produit alors un courant d'électrons de la cathode vers l'anode (parfois appelée anticathode ou cible).

Les électrons sont freinés par les atomes de la cible, ce qui provoque un rayonnement continu de freinage dont une partie du spectre est dans le domaine des rayons X.

Ces électrons excitent les atomes de la cible, et ceux-ci réémettent un rayonnement X caractéristique par le phénomène de fluorescence X.

Le spectre sortant du tube est donc la superposition du rayonnement de freinage et de la fluorescence X de la cible.

1.4 Interaction des électrons avec la matière

L'interaction des électrons émis par le filament avec la matière (anode) engendre deux types différents d'interaction ; interaction avec le champ électrique péri-nucléaire ou avec les électrons de l'atome.

1.4.1 Interaction avec le champ électrique péri nucléaire :

L'électron est chargé négativement, quand il passe à proximité du noyau d'un atome du métal (anode) qui est chargé positivement, l'électron est soumis à une force attractive vers le noyau ce qui résulte un changement de la trajectoire de l'électron en rapprochant vers le noyau et émission d'un rayonnement blanche.

Le rayonnement émis est appelé aussi rayonnement de freinage .il dépend de la distance à laquelle l'électron incident passe du noyau .ce type d'interaction permet d'interpréter l'émission continue des rayons X car les photons de freinage peuvent prendre les valeurs énergétiques comprises entre 0 et l'énergie des électrons incidents E_0 .

1.4.2 Interaction avec les électrons :

Dans ce type d'interaction les électrons proviennent du filament entrent en collision avec les électrons des atomes de l'anticathode, deux types de chocs peuvent exister ; un choc frontal et un choc tangentiel. Selon l'énergie des électrons incidents et l'énergie de liaison des électrons cible on peut avoir une excitation ou une ionisation.

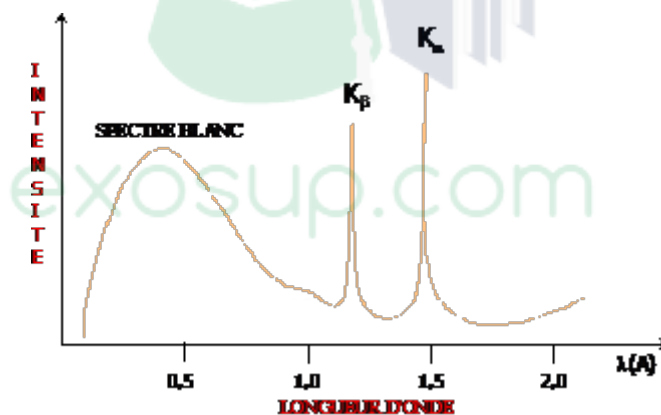
Si l'interaction a lieu avec un électron d'une couche profonde, le réagencement électronique entraînera une émission de photons x.

Chapitre 2

Analyse spectrale des rayons x

2.1 Spectre d'émission :

Un spectre d'émission de rayons X consiste en la superposition d'un spectre continu et d'un spectre discret de raies.



2.2 Spectre continue

Il est due au freinage des électrons incidents à côté du noyau .dans ce processus l'électron incident perd une quantité de son énergie cinétique, ou son énergie total et dans ce dernier cas la fréquence du photon émis est maximal, Le freinage dépend évidemment de la distance à laquelle l'électron se rapproche du noyau et les photons émis peuvent avoir toutes les énergies comprises entre l'énergie cinétique zéro et E_c .

La différence de potentiel entre l'anode et la cathode, ainsi que le nombre d'électrons incidents influencent sur le spectre ; l'augmentation de la tension modifie la longueur

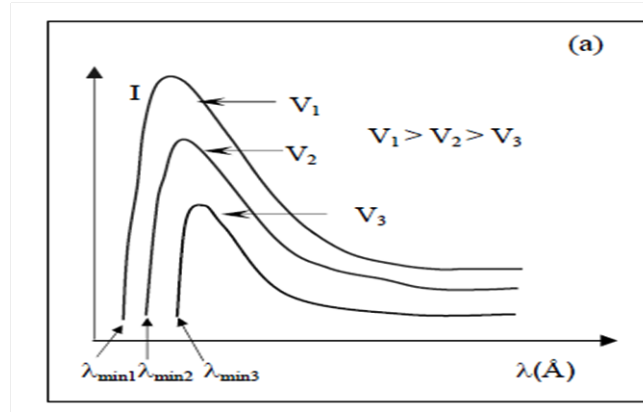


FIGURE 2.1: Variation du spectre continue en fonction de la tension appliquée

d'onde maximal, il se déplace vers les courtes longueurs d'onde, proportionnellement au numéro atomique de l'élément constituant l'anticathode et la surface de la courbe croît.

2.3 Spectre discret :

Ce type de spectre mis en jeu les niveaux profonds de l'atome, Un électron incident d'énergie E_{cin} peut expulser un électron d'un atome de la cible dont l'énergie de liaison est plus petite que E_{cin} , créant ainsi un trou dans une couche interne. L'atome se trouve alors dans un état excité instable et tend à retourner dans son état fondamental (de moindre énergie): le trou est alors comblé par un électron d'une couche supérieure, donc émission d'un photon dont l'énergie E des photons émis est égale à la différence des énergies des couches concernées (*wi et wf*). Les fréquences correspondantes étant données par :

$$E = h.v = E_I - E_f$$

La raie peut être (successivement) $k\alpha$ ou $k\beta$ selon que l'électron qui remplace le trou laissé dans la couche k provient de la couche L ou de la couche M .

Le spectre discret est un spectre caractéristique de la cible.

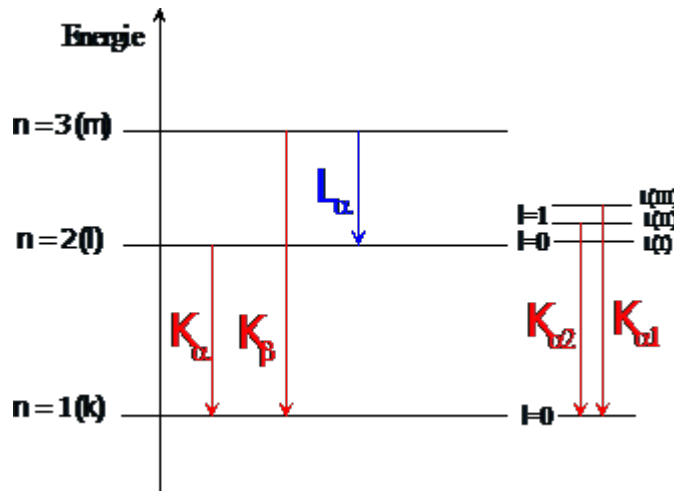


FIGURE 2.2: Décomposition des transitions à l'origine du spectre de raies

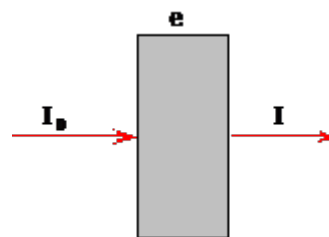
2.4 Interaction des rayons x avec la matière :

2.4.1 Absorption des rayons x :

La plupart des méthodes utilisées pour la diffraction des rayons x, ainsi que les méthodes non cristallographiques utilisent rayonnement X monochromatique.

Les photons X peuvent être absorbés par la matière en raison de leurs énergies élevées qui peuvent chasser les électrons des couches de l'élément absorbant (filtre).

Si on envoie un faisceau de radiation x sur un milieu (matière), le flux émergent sera atténué.



L'intensité émergente suit la loi de Lambert :

$$I = I_0 \cdot \exp(-\mu e)$$

I_0 : est l'intensité incidente

I est l'intensité transmise,

μ : est un coefficient d'absorption caractéristique du matériel absorbant et de la longueur d'onde utilisée.

e : est l'épaisseur du milieu

En pratique, et pour avoir un rayonnement approximativement monochromatique, on doit choisir le filtre qui correspond à la longueur d'onde de la raie indésirable de l'anticathode, cela est fait lorsque le filtre est constitué d'un métal ayant le numéro atomique inférieur de quelque unité à celui de l'anticathode.

Les filtres utilisés dans les tubes à rayons x jouant le rôle des fenêtres ou le rayonnement approximativement monochromatique sort.

2.5 Réfraction :

Les rayons x comme lumière subit la réfraction par changement de direction en traversant un milieu d'indice de réfraction bien connu, dans la pratique la réfraction des rayons X est un phénomène négligeable.

Chapitre 3

généralité et principe physique du diffraction

A toute structure cristallin sont associes deux réseau : le réseau direct et le réseau réciproque .le réseau cristallin est un réseau de l'espace réel et ses vecteurs ont les dimensions d'une longueur ; le réseau réciproque est un réseau de l'espace de Fourier associe au réseau direct, ou l'image du réseau direct par la diffraction des rayons X, et ses vecteur ont les dimensions de longueur inverses.

Chaque nœud est une extrémité d'un vecteur de réseau réciproque dont l'origine est l'origine du réseau. Soit H une vecteur du réseau réciproque dont la base est (a, b, c), il s'écrit sous la forme :

$$\vec{H} = h.\vec{a^*} + k.\vec{b^*} + l.\vec{c^*}$$

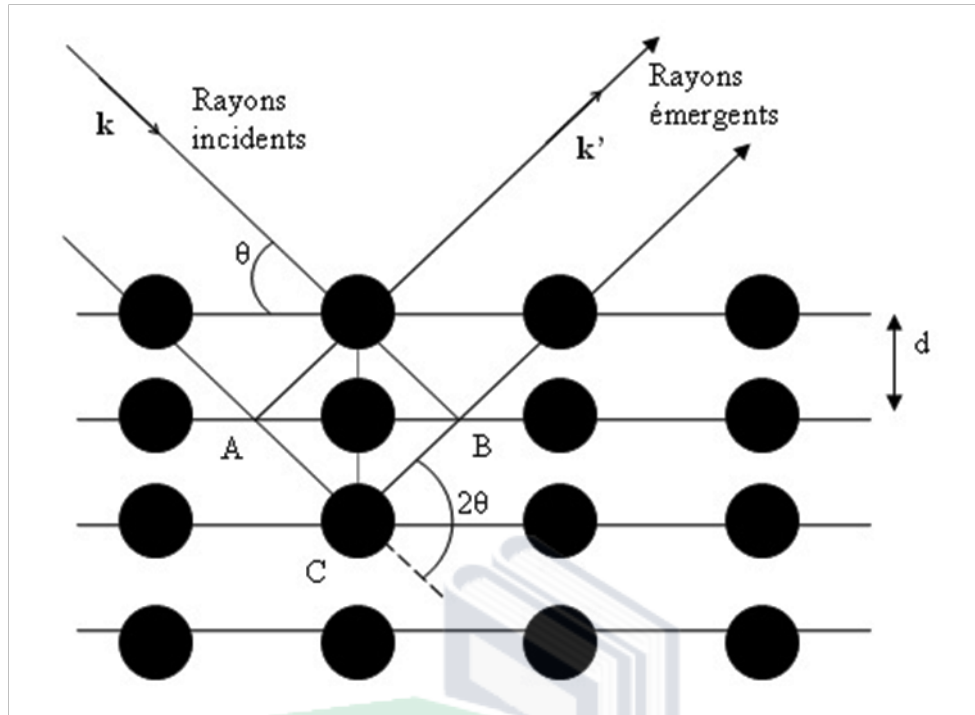
Avec:

- h, k et l sont des entiers connues dans la cristallographie par indices de Miller.
- $\vec{a^*}$, $\vec{b^*}$ est $\vec{c^*}$ sont des vecteurs définissants une maille élémentaire,

L'ensemble des vecteurs H du réseau réciproque détermine les réflexions des rayons X possibles ce qui nécessite l'utilisation du réseau réciproque pour interpréter les figure de diffraction.

La diffraction des rayons X par un cristal ne peut avoir lieu que dans certaines conditions bien précises:

3.1 Condition de diffraction de Bragg (loi de Bragg) :



Soient deux ondes arrivant sur deux plans réticulaire sous un angle d'incidence Θ et diffusées sur le même angle, la différence de marche entre les ondes est donnée par:

$$\delta = AC + CB = 2.d. \sin(\Theta)$$

La diffraction aura lieu quand la condition d'interférence constructive est vérifiée à savoir:

$$\delta = n.\lambda$$

La loi de Bragg s'écrit donc :

$$2.d. \sin(\Theta) = n.\lambda$$

λ :longueur d'onde

n : ordre d'incidence

Θ : angle d'incidence

3.2 Méthodes des poudres

Les poudres : est l'ensemble de monocristaux orientés aléatoirement. La méthode générale consiste à bombarder l'échantillon avec des rayons X, et à regarder l'intensité de rayons X qui est diffusée selon l'orientation dans l'espace. Les rayons X diffusés interfèrent entre eux, l'intensité présente donc des maxima dans certaines directions ; on parle de phénomène de **diffraction**. On enregistre l'intensité détectée en fonction de l'angle de déviation 2Θ du faisceau; la courbe obtenue s'appelle le diffractogramme. L'échantillon est une poudre homogène isotrope ou bien un solide composé de minuscules cristaux soudés entre eux; on parle de fait de méthode des poudres.

La source de rayons X est un tube sous vide, muni d'un dispositif permettant de ne sélectionner qu'une seule longueur d'onde (filtre, monochromateur); on travaille en monochromatique.

3.3 Diffractomètre

Le diffractomètre est un appareil permettant de mesurer la diffraction d'un rayonnement sur une cible

3.3.0.1 Principe de la méthode

- L'échantillon est une poudre
- Les rayons X monochromatiques
- Les rayons diffractés sont enregistrés à l'aide d'un compteur

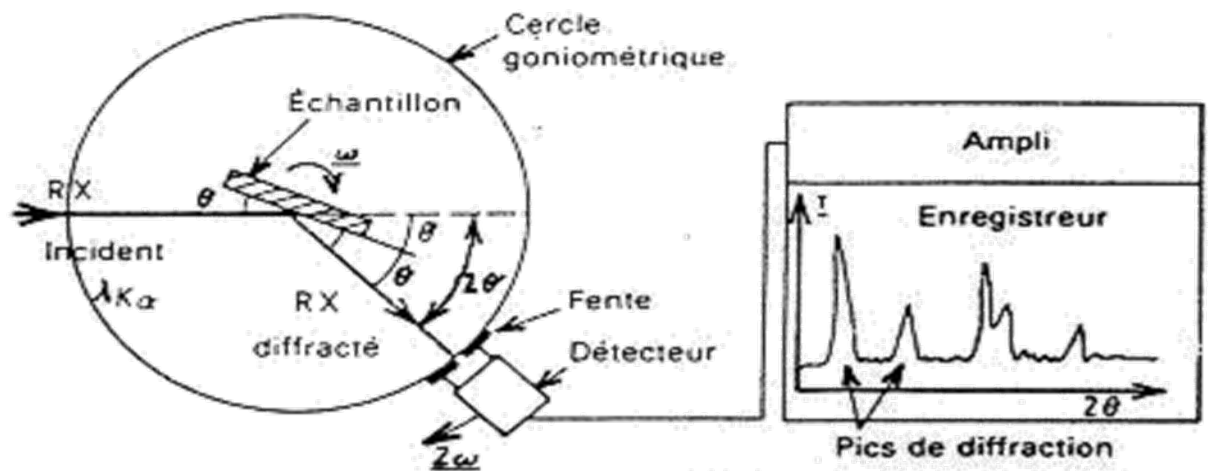
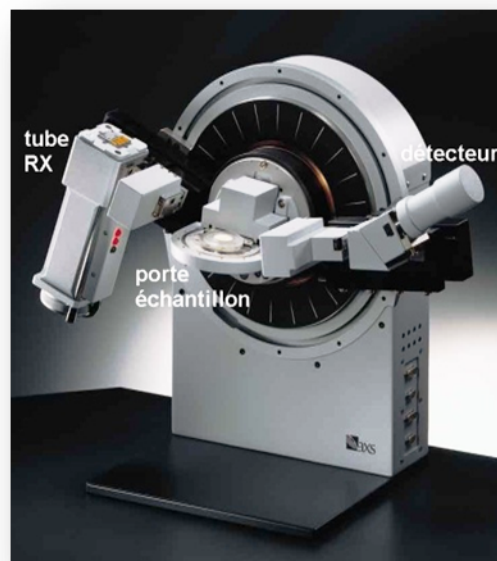
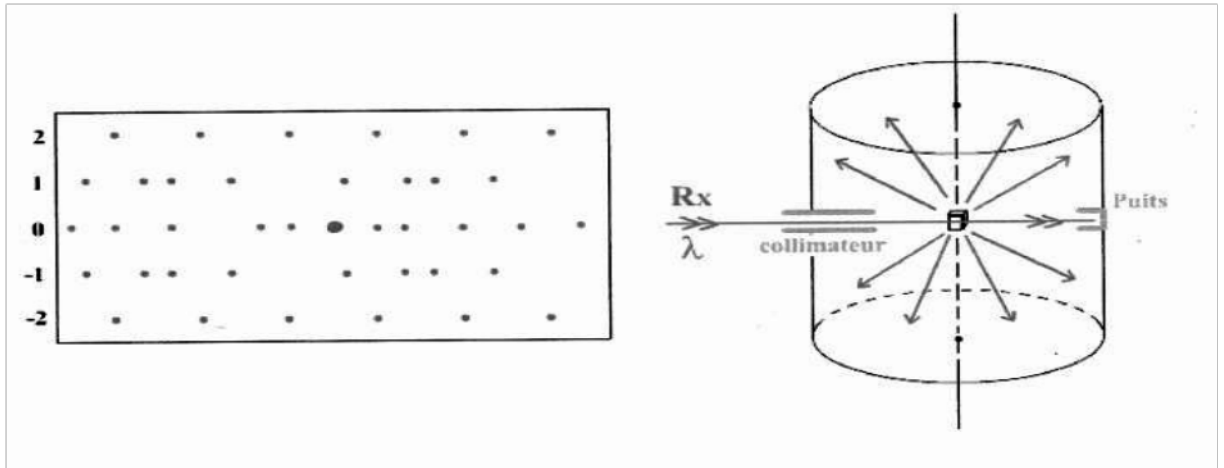


FIGURE 3.1: Principe du diffractomètre de poudre



3.4 Méthode du cristal tournant



Pour cette méthode il faut disposer d'un monocristal (de bonne qualité). Le cristal de petite taille est placé au centre de la chambre. Il tourne autour de son axe et reçoit le faisceau incident de rayons X monochromatique.

Chaque rayon réfracté se traduit par l'apparition d'une tache sur la plaque photographique.

3.5 Méthode de Laue

3.5.1 Principe de la méthode

- Un monocristal est maintenu immobile dans un faisceau poly-chromatique de rayons X.
- Le cristal diffracte seulement les ondes pour lesquelles la loi de Bragg est vérifiée.

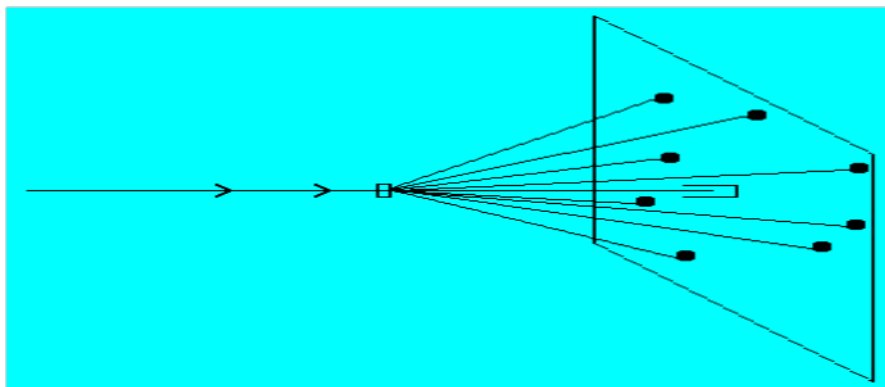


FIGURE 3.2: Les rayons diffractés sont enregistrés sur un film photographique normal au pinceau incident.

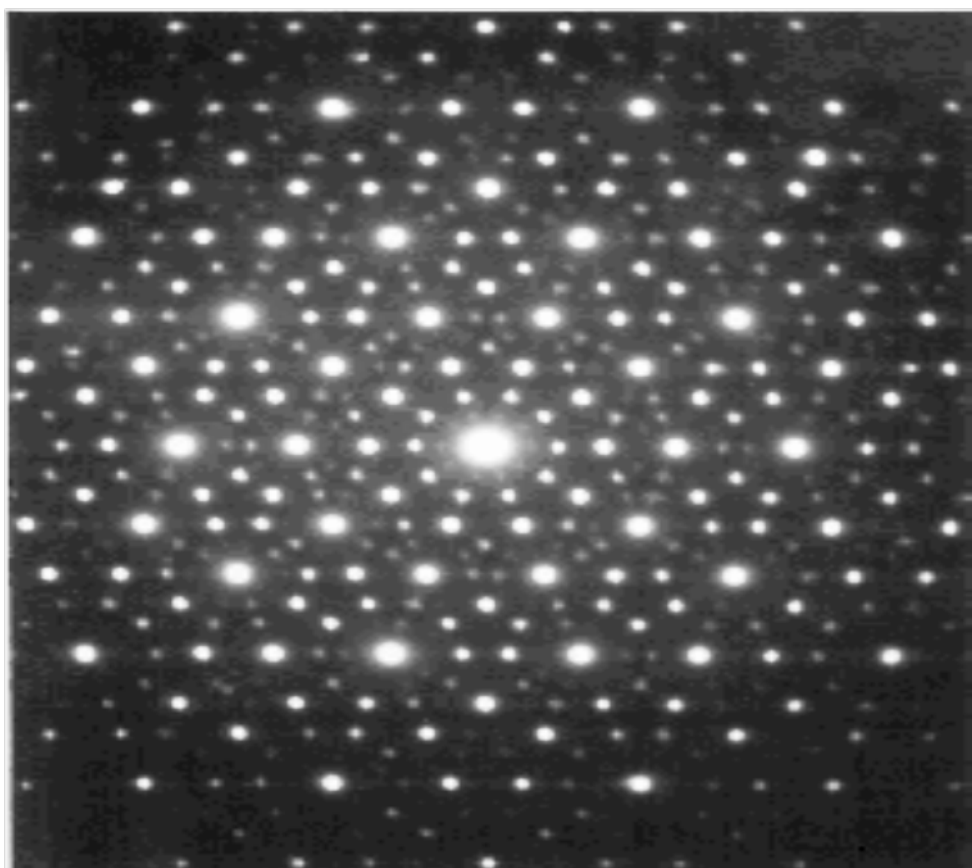


FIGURE 3.3: Diagramme de Laüe

Chapitre 4

Les applications de la diffraction des rayons x

4.1 Le rôle des rayons x

Les rayons x sont connues du grand public pour l'imagerie médicale. Ils sont utilisés dans la chimie, la physique et la biologie etc.

Une des applications pour la chimie c'est l'analyse élémentaire par fluorescence X. Cette technique permet de savoir quels sont les atomes qui composent l'échantillon à analyser et en quelles proportions.

On parle aussi de la radiologie dans le domaine médical, désigne l'ensemble des modalités diagnostiques et thérapeutiques utilisant seulement les rayons X.

Pour la physique et surtout la physique du solide, la diffraction des rayons X est une méthode universelle utilisée pour identifier la nature et la structure des produits cristallins car cette méthode ne s'applique qu'à des milieux cristallins (roches, cristaux, minéraux ...) dont l'arrangement de leurs atomes est périodique, ordonné et s'organise en plans réticulaires plus ou moins denses.

4.2 Facteur de structure

Le facteur de structure F_{hkl} appelé facteur de structure de la base ou motif.

$$\mathcal{F}_{hkl} = f_j e^{-2\pi i(hx + ky + lz)}$$

f_j : appelé facteur de forme atomique qui dépend de la structure électronique de l'atome considéré et dont les valeurs se trouvent dans les tables internationales de diffraction.

des rayons X x, y, z : les coordonnées de l'atome j dans la maille; h, k, l : les indices de Miller du plan considéré; Notons que F_{hkl} est un nombre complexe, L'amplitude qui est réelle dépend du module de F_{hkl} .

On appelle extinctions systématiques les valeurs h, k et l qui annulent le facteur de structure F_{hkl} . Elle renseignent sur le mode d'un réseau P, I, C ou F.

4.3 Exemple

Réseau cubique à faces centrées CFC nous avons quatre atomes par maille de coordonnées (000) , $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ et $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$.

Le facteur de structure est donc :

- Si les indices sont tous pairs ou tous impairs $F_{hkl} = 4f$.
- Si les indices ne sont pas tous de même parité $F_{hkl} = 0$.

En conclusion, dans le réseau CFC, il n'y a pas de réflexion pour les plans dont les indices ne sont pas de même parité.

4.4 Résultat

4.4.1 Détermination d'une structure cristalline

À partir des intensités diffractées et de la relation inverse (réseau réciproque-réseau réel), il est possible, à partir d'une série d'images de diffraction sur un monocristal, de déterminer l'arrangement tridimensionnel des atomes d'une structure cristalline.

Conclusion

On présente une revue des applications de la diffraction des rayons x dans différents domaines de la science des matériaux: identification et analyse quantitative des phases dans les solides microcristallisés, détermination des textures, détection des défauts par topogramme de lang, étude des défauts de périodicité dans les solutions solides. on insiste sur le fait que les méthodes expérimentales doivent être souvent plus raffinées dans des recherches appliquées que dans les recherches fondamentales.

Références

- <http://fr.wikipedia.org/wiki/Cristallographie-aux-rayons-X>
- <http://loic.portelette.fr.fr/Methodes/Dx/DiffractionX.htm><http://>
- culturesciencesphysique.enslyon.fr/ressource/Diffraction
- [rayons-X-techniques-determination-](#)
- [structure.xmlhttp://www.spectropole.fr/drx1.htm](http://www.spectropole.fr/drx1.htm)
- Introduction a la physique des matériaux : prf Aggour
- Cours des physique des solides rabat (2012-2011)